

# Pressemitteilung

## DLR beauftragt d-fine mit der Wassersimulation auf Quantencomputern

Frankfurt am Main | 09.11.2023

- d-fine wurde vom Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt (DLR) ausgewählt, um im Projekt QuantiCoM H2Q der DLR Quantencomputing-Initiative die Entwicklung von Algorithmen für atomistische Simulationen im Bereich Statik und Dynamik von Wasser und Wasserstoff voranzutreiben.
- d-fine führt den Auftrag gemeinsam mit planqc und Molecular Quantum Solutions (MQS) durch.
- Quantencomputer gelten als disruptive Technologie, die wesentlich schnellere Berechnungen und Simulationen in einer Vielzahl von Anwendungsbereichen wie dem Verhalten von wasser-basierten und wasserstoff-basierten Stoffgemischen im Zusammenspiel mit periodischen Materialien wie zum Beispiel Legierungen (z.B. Metallhydride) ermöglichen.
- Die DLR Quantencomputing-Initiative (DLR QCI) bindet Start-ups, Industrie und Forschung ein, um gemeinsam Quantencomputer, Software- und Anwendungen und die nötigen Enabling-Technologien zu entwickeln.
- d-fine ist eine europäische Unternehmensberatung, die sich durch 1.500 Expertinnen und Experten mit naturwissenschaftlichem Hintergrund auf technisch und analytisch anspruchsvolle Themen spezialisiert hat.
- MQS wurde im Jahr 2019 mit Unternehmenssitz in Søborg (Dänemark) gegründet und entwickelt eine cloudbasierte Plattform für die Simulation von Chemikalien und molekularen Strukturen.
- planqc ist im Münchner Quantum Valley angesiedelt und wurde 2022 von Wissenschaftlern des Max-Planck-Instituts für Quantenoptik und der Ludwig-Maximilians-Universität München gegründet, und baut und vermarktet als erstes rein deutsches Unternehmen hochskalierbare Raumtemperatur-Quantencomputer basierend auf Atomen in optischen Gittern.
- Stichworte: Quantentechnologie, Quantenalgorithmen, Materialsimulation, Medikamententwicklung, Quantencomputing, Wasser, Wasserstoff

# Pressemitteilung

**Frankfurt am Main, 09. November 2023 – d-fine wird im Projekt QuanticoM H2Q gemeinsam mit dem Deutschen Zentrum für Luft- und Raumfahrt die Möglichkeiten von Quantencomputing nutzen, um Problemstellungen im Bereich der Materialsimulation zu identifizieren und zu lösen. planqc und MQS bringen zusätzliche Expertise ein.**

Als Vorreiter in ihrem jeweiligen Fachgebiet bündeln planqc, MQS und d-fine ihre Expertise, um gemeinsam im Rahmen der DLR Quantencomputing-Initiative (DLR QCI) mit Forschenden an den DLR-Instituten für Werkstoff-Forschung, für Materialphysik im Weltraum und für Technische Thermodynamik im Projekt QuanticoM H2Q Quantencomputer-Algorithmen für atomistische Simulationen von Wasser und Wasserstoff zu entwickeln und zu evaluieren.

Das DLR verfolgt mit seinem DLR QCI-Projekt QuanticoM (Quantum Computing for Materials Science and Engineering) das Ziel, die Entwicklung von fortschrittlichen Methoden unter Nutzung von Quantencomputern für die Materialwissenschaften, die Werkstofftechnik und Industrie voranzutreiben, um perspektivisch eine schnellere Materialentwicklung zu ermöglichen. Das Teilprojekt „QuanticoM H2Q“ beinhaltet die Entwicklung von Algorithmen für atomistische Simulationen im Bereich Statik und Dynamik von Wasser und Wasserstoff, ausgehend von klassischen Rechnungen mit dem Ziel der Optimierung für Quantenhardware.

Die Simulation von Wasser bietet eine hervorragende Möglichkeit, die Fähigkeiten und Grenzen in der Materialsimulation zu testen, neue Methoden zu entwickeln und zu validieren, sowie grundlegende Zusammenhänge zwischen Struktur, Dynamik und weiteren Eigenschaften von Materialien zu untersuchen. Da Wasser und Wasserstoff in vielen technischen und biologischen Prozessen allgegenwärtig sind, kann eine präzisere Vorhersage der Dynamik und von Reaktionsmechanismen dieser Moleküle unmittelbar viele Forschungsbereiche und industrielle Anwendungen voranbringen. Beispiele sind das Verständnis von Degradationsprozessen oder optimale Betriebsparameter von Elektrolyseuren, die Materialsimulation von Legierungen in Kontakt mit Wasserstoff und die effizientere Simulation von Wirkstoffkandidaten für die Medikamententwicklung. Viele der grundlegenden physikalischen Prinzipien und Modellierungsansätze, die bei der Simulation von Wasser angewendet werden, sind zudem auch auf andere Flüssigkeiten, Lösungen oder komplexe Materialien übertragbar.

---

## Pressemitteilung

Die herausfordernde Aufgabe, Wasser und seine verschiedenen Formen unter Berücksichtigung größerer Systeme und mehrskaliger Effekte zu simulieren, bringt klassische Methoden und bekannte Ab-initio-Methoden an Ihre Grenzen. Dies ist auf den exponentiellen Anstieg der Komplexität und damit der benötigten Rechenzeit mit steigender Teilchenzahl zurückzuführen. Der Einsatz von Quantencomputern (QC) verspricht durch eine bessere Skalierbarkeit der Simulationen eine Revolution in diesem Bereich.

Derzeitige digitale Quantencomputer sind allerdings sowohl durch die Anzahl der verwendbaren Qubits als auch durch ihre Gatterqualität limitiert. Während die Anzahl der Qubits die Menge an Information begrenzt, die verarbeitet werden kann, führt die begrenzte Gatterqualität unweigerlich zu Fehlern im Ergebnis von Berechnungen, weshalb sie als NISQ-Computer (kurz für noisy intermediate-scale quantum) bezeichnet werden. Variationelle Quanten Algorithmen (VQA) wie zum Beispiel der Variationelle Quanten Eigensolver (VQE) oder der Quanten Approximative Optimierungs Algorithmus (QAOA) haben in der Lösung von quantenchemischen Modellen auf einer hybriden „klassischen+NISQ“ Architektur Einzug gefunden. Sie haben das Potential, bei spezifischen Molekülen (z.B. korrelierte Systeme, quantendynamische Systeme) im Verhältnis zwischen Lösungsgenauigkeit und benötigter Rechenzeit einen (Quanten-) Vorteil gegenüber klassischen Methoden zu erzielen.

Die Auswahl von d-fine zur Unterstützung in diesem ambitionierten Projekt bestätigt deren Aktivitäten und Erfolge im Feld Quantum Computing. So ist d-fine unter anderem Gründungsmitglied des PlanQK Konsortiums, welches 2020 unter Förderung des Bundesministeriums für Wirtschaft und Klimaschutz gegründet wurde und Quantum Applikationen für diverse Anwendungsfälle entwickelt und implementiert. Das deutsche Start-up planqc wurde im April 2022 gegründet und entwickelt neben Quantencomputing-Hardware auch Algorithmen im Hardware-Software-Co-Design. Für planqc und d-fine stellt dies, nach dem Auftrag zur Verbesserung von Klimamodellen mit Hilfe von Quantum Machine Learning, bereits das zweite DLR-Projekt dar. MQS ist ein im Jahre 2019 gegründetes dänisches Start-Up, das eine cloudbasierte Simulationsplattform entwickelt, die es Usern erleichtert, Stoffgrößen von Chemikalien und molekularen Strukturen zu ermitteln. Gemeinsam mit planqc und MQS ist d-fine damit der ideale Partner für das DLR und die Entwicklung von QC-Algorithmen für atomistische Simulationen von Wasser und Wasserstoff.

**ENDE**

# Pressemitteilung

## ANMERKUNGEN FÜR HERAUSGEBER

### Pressekontakt

Astrid Döring  
Head of Marketing & Communication

d-fine GmbH  
An der Hauptwache 7  
D-60313 Frankfurt/Main  
+49 69 90737 0  
astrid.doering@d-fine.com

### Über MQS

Molecular Quantum Solutions ApS (MQS) ist ein im Jahre 2019 gegründetes Start-Up. Unternehmenssitz von MQS ist Søborg außerhalb von Kopenhagen (Dänemark) im Alfa Laval Innovation House. MQS wurde von zwei PhD-Absolventen der Technischen Universität von Dänemark (DTU) gegründet: Mark Nicholas Jones und Lukasz Ruszczyński. Die Expertise von MQS fußt auf quantenchemischen Simulationen für thermodynamische Stoffgrößen und computergestützte Multiskalenmodellierung. MQS entwickelt eine cloudbasierte Simulationsplattform, um es Anwendern zu erleichtern, Stoffgrößen von Chemikalien und molekularen Strukturen zu ermitteln.

Weitere Informationen finden Sie unter <https://mqs.dk>

### Über planqc

planqc baut Quantencomputer und speichert Quanteninformation in einzelnen Atomen – von Natur aus die besten Qubits. Die Quanteninformation wird verarbeitet, indem diese Qubits in hochskalierbaren Registern angeordnet und anschließend durch präzise kontrollierte Laserpulse manipuliert werden. planqc zeichnet sich durch eine einzigartige Kombination von Quantentechnologien aus, die den schnellsten Weg zu Quantenprozessoren mit tausenden von Qubits eröffnet, und schafft damit die notwendige Voraussetzung für einen industrierelevanten Quantenvorteil. planqc wurde im April 2022 von Alexander Glätzle, Sebastian Blatt, Johannes

# Pressemitteilung

Zeiber, Lukas Reichsöllner zusammen mit Ann-Kristin Achleitner und Markus Wagner gegründet. planqc hat seinen Sitz in Garching bei München, zu den wissenschaftlichen Beratern zählen Prof. Dr. Dieter Jaksch (Oxford University und Universität Hamburg) und Prof. Dr. J. Ignacio Cirac (Direktor am MPQ).

Weitere Informationen finden Sie unter <https://www.planqc.eu>

## Über d-fine

d-fine ist ein europäisches Beratungsunternehmen mit Fokus auf analytische und quantitative Herausforderungen und die Entwicklung nachhaltiger technologischer Lösungen. Die Kombination aus über tausend naturwissenschaftlich geprägten Mitarbeiterinnen und Mitarbeitern und langjähriger Praxiserfahrung ermöglicht passgenaue, effiziente und nachhaltige Umsetzungen für unsere mehr als zweihundert Kunden aus allen Wirtschaftsbereichen.

Weitere Informationen finden Sie unter <https://www.d-fine.com/>

## Über die DLR Quantencomputing-Initiative (DLR QCI) des Deutschen Zentrums für Luft- und Raumfahrt (DLR)

Das Potenzial von Quanteninformationstechnologien zählt zu den grundlegenden und wegweisenden Kompetenzen der Zukunft. Es besteht die Möglichkeit, mit dem daraus resultierenden Leistungsvermögen Schlüsselbranchen zu revolutionieren. Unter allen Technologien stellen Quantencomputer einen strategisch zukunftsrelevanten und aktuell nahezu exponentiell wachsenden Forschungs- und Entwicklungsbereich dar, für den jetzt auf nationaler und internationaler Bühne die entscheidenden Weichen gestellt werden. Die DLR Quantencomputing-Initiative (DLR QCI) bindet Start-ups, Industrie und Forschung ein, um gemeinsam Quantencomputer, Software- und Anwendungen und die nötigen Enabling-Technologien zu entwickeln. Die Mittel dafür stellt das Bundesministerium für Wirtschaft und Klimaschutz (BMWK) zur Verfügung. So entsteht an den DLR-Innovationszentren Ulm und Hamburg die wirtschaftliche und industrielle Basis für das Ökosystem Quantencomputing.

Weitere Informationen finden Sie unter <https://qci.dlr.de/>